

MODELAGEM DA ESTRUTURA E REATIVIDADE EM ZEÓLITO: APLICAÇÃO EM CATÁLISE

Bolsista ProFIS/SAE: Mateus Barandas de Almeida
 Mateus.barandas@hotmail.com

Orientador: Prof Dr Nelson Henrique Morgon
 Morgon@iqm.unicamp.br

Palavras-chave: zeólito, energia, modelagem.

INTRODUÇÃO

Hoje em dia, muitos avanços tecnológicos são feitos com base em modelagem por ser um método fácil e muito prático. Ela consiste em gerar, representar e/ou manipular modelos químicos da forma mais realista possível por meio de química teórica e computação gráfica. Esta pesquisa visa usar a modelagem para calcular as maiores quantidades de energia de interação entre as moléculas de metanol, acetona e etileno, uma de cada vez, em meio a um cluster do zeólito ácido H-ZSM-5. Os resultados podem ajudar no avanço de algumas áreas como, por exemplo, na obtenção de combustíveis derivados de petróleo ou na fabricação de fármacos. Os zeólitos são como peneiras moleculares que são usados na indústria como catalisadores. Assim, o H-ZSM-5 foi escolhido por ser um ótimo catalisador à base de seleção geométrica.

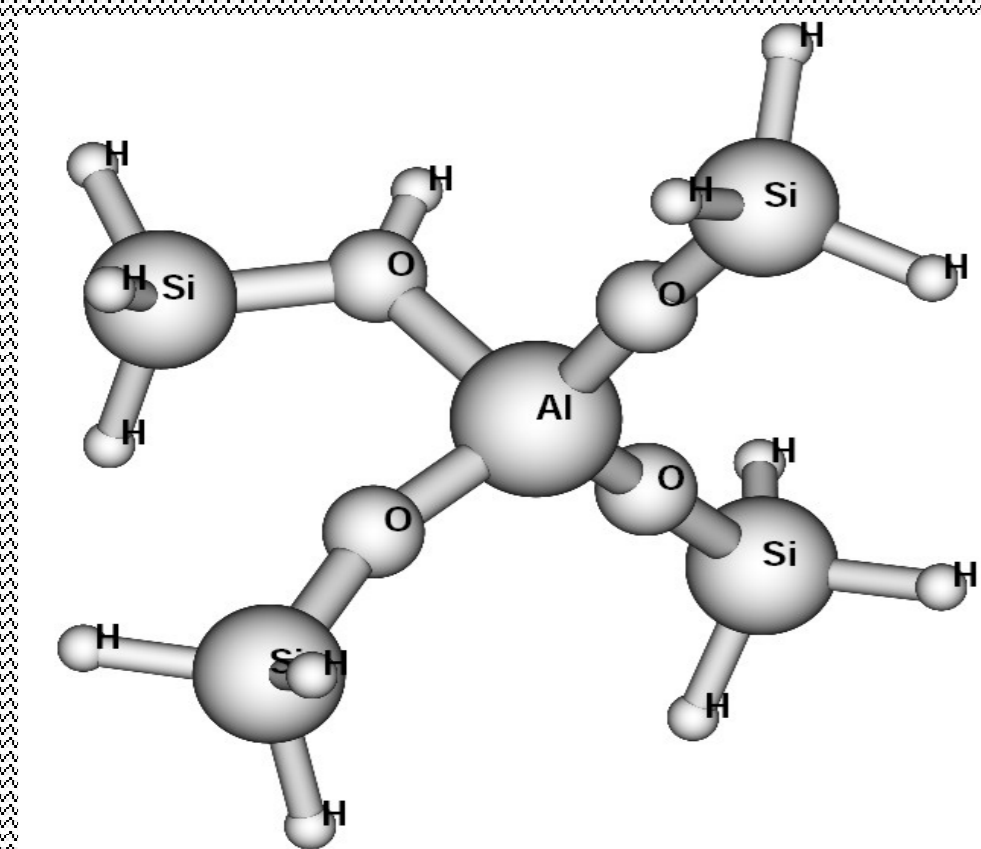


Figura 1 – Cluster de ZSM-5

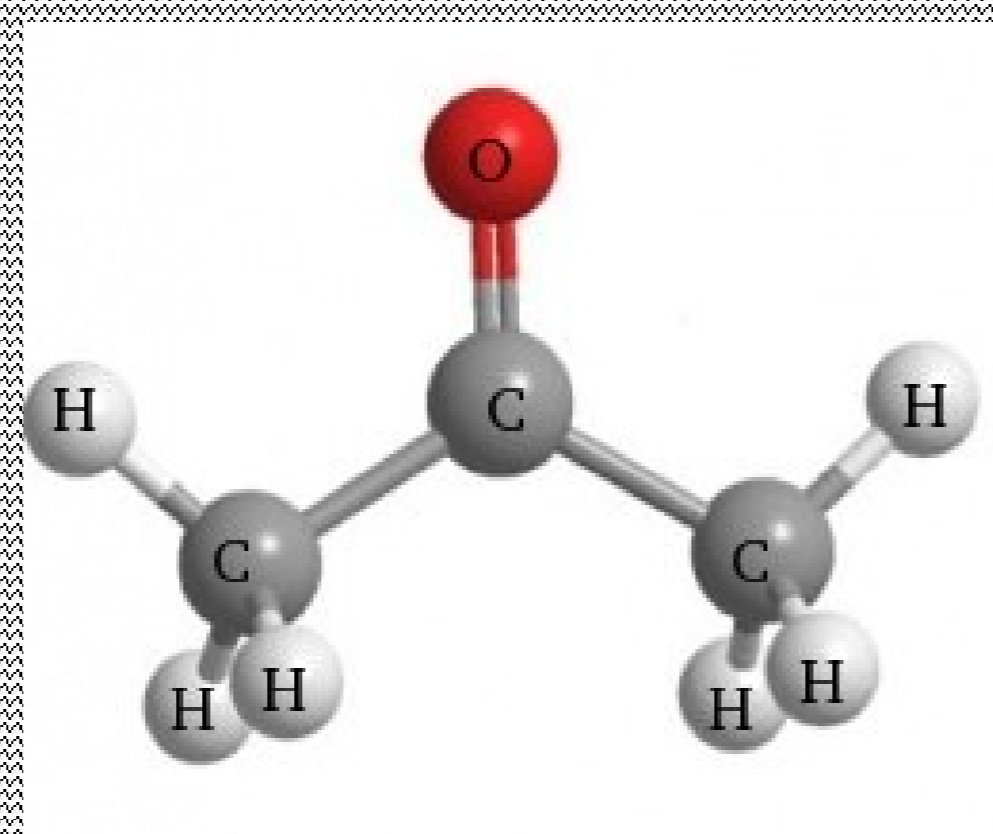


Figura 2 – Molécula de Acetona

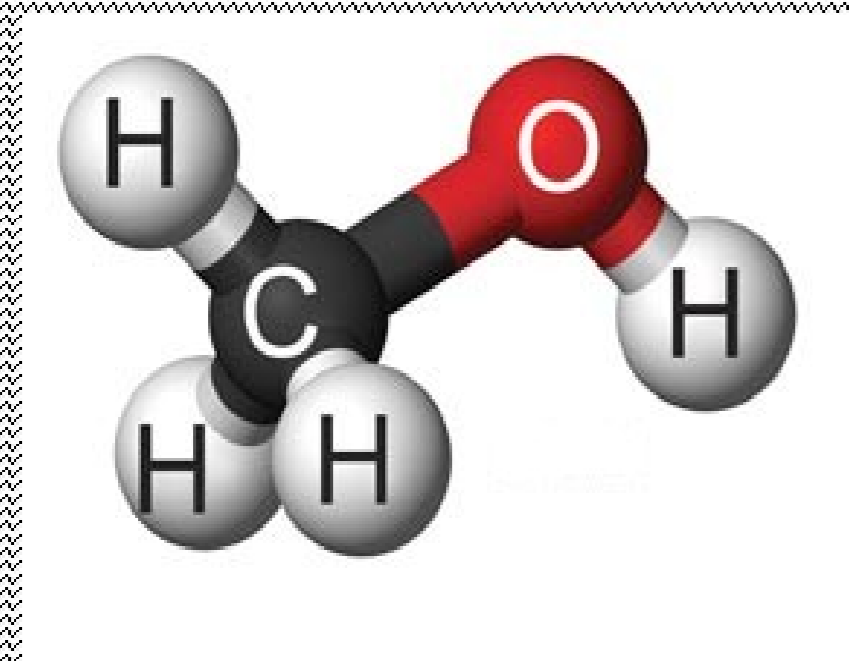


Figura 3 – Molécula de Metanol

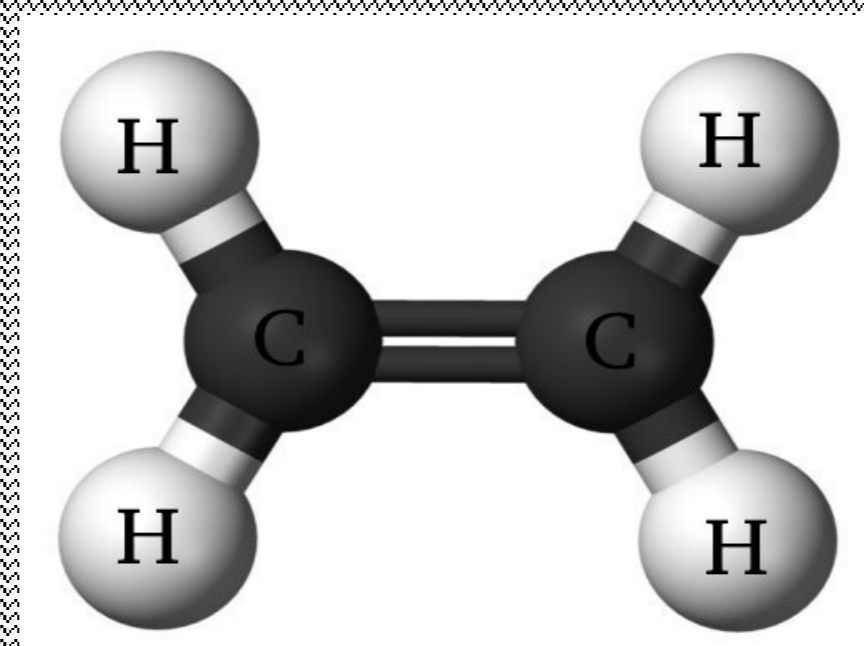


Figura 4 – Molécula de Etileno

MATERIAIS E MÉTODOS

Na prática, o método usado para conseguir os valores dessas energias de interação foi modelar cada uma das moléculas, pelo software Molden, obtendo assim as coordenadas de cada átomo. O arquivo do Molden é salvo em formato de coordenada xyz e depois modificado para input. Como input, é possível usar o VI para colocar no próprio arquivo o que queremos que seja feito. Por último, o software Gaussian03 (G03) lê este arquivo, otimiza e calcula a energia final do sistema, seja ele grande (como um cluster de zeólito) ou pequeno (como uma molécula). O nome deste método é Mecânica Molecular, que tem a mesma base da mecânica clássica, porém aplicada em sistemas moleculares grandes ou pequenos. O diferencial da Mecânica Molecular é que ela não trata as moléculas como núcleos e elétrons, mas sim um conjunto de átomos conectados, o que é bom, pois os parâmetros associados a razoavelmente constantes entre estruturas diferentes, desde que o tipo e a hibridação dos átomos envolvidos

sejam os mesmos. A energia de interação (ΔE_{int}), em Kcal/mol, é dada pela diferença das energias de antes e depois da interação e multiplicado pela constante 627,51. Assim, se temos, por exemplo, a energia final da molécula ou sistema A (E_A), a energia final da molécula ou sistema B (E_B) e a energia final das moléculas ou sistema AB depois de interagido (E_{AB}), a energia de interação será:

$$\Delta E_{int} = [E_{AB} - (E_A + E_B)] \times 627,51$$

E quanto maior a energia de interação, mais estável é o sistema.

RESULTADOS

Como é possível ver na Tabela 1, a energia de interação mais forte ocorre entre o cluster do zeólito H-ZSM-5 e a molécula de acetona.

Tabela 1 – Energias de interação entre as moléculas de estudo e o cluster de H-ZSM-5.

		Molécula/ Sistema	E_{AB}	ΔE_{int} (Kcal/mol)
EA	Metanol	0,00288	5,67768	122,06324
EB	Clust. Zeólito	5,67480		
EA	Etileno	0,00023	5,67503	94,39632
EB	Clust. Zeólito	5,67480		
EA	Acetona	0,00056	5,67536	128,38227
EB	Clust. Zeólito	5,67480		

A molécula com menor energia de interação em relação ao cluster é o etileno. Isso significa que esta estrutura é mais instável.

Apesar de serem quase iguais as energias de interação entre o zeólito, acetona e metanol, a interação mais forte e estrutura mais estável ocorre com a acetona.

AGRADECIMENTOS

Ao SAE, pela concessão da bolsa. Ao Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon e aos técnicos por todo auxílio necessário para a realização deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- SILVA, T. H. A. *Modelagem molecular com o auxílio do computador*. Belo Horizonte, 2006.
 MASCARENHAS, A. J. S., OLIVEIRA, E. C. e PASTORE, H. O. *Peneiras moleculares: selecionando moléculas por seu tamanho*. Campinas, 2001.
 CAVENATI, S. *Separações de misturas CH₂/CO₂/N₂ por processos adsorptivos*. Portugal, 2005.
 Retirado de <http://www.uff.br/RVQ/index.php/rvq/article/viewFile/13/32> (último acesso em 24/10/2013).